

唐敖庆

理论化学中的 群论方法

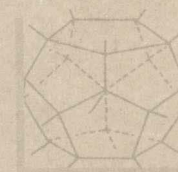
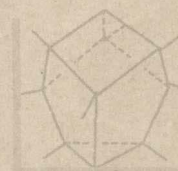
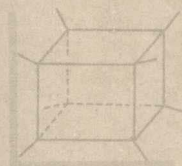
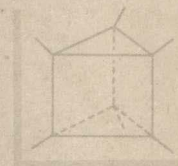


O64
T235:1

064

T235

234



唐敖庆 理论化学中的 群论方法

(李伯符 郭纯孝 整理)

图书在版编目 (CIP) 数据

理论化学中的群论方法/名唐敖庆编著. —长春:
吉林大学出版社, 2003. 9
ISBN 7—5601—3017—8

I. 理… II. 唐… III. 群论—应用—物理化学
IV. 064

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2003) 第 007420 号

理论化学中的群论方法

唐 敖 庆

责任编辑、责任校对: 赵洪波

封面设计: 孙 群

吉林大学出版社出版
(长春市明德路 3 号)

吉林大学出版社发行
吉林农业大学印刷厂印刷

开本: 787×1092 毫米 1/16

2003 年 9 月第 1 版

印张: 41.25

2003 年 9 月第 1 次印刷

字数: 953 千字

印数: 1—500 册

ISBN 7—5601—3017—8/O · 283

定价: 88.00 元

序

1999年由吉林大学郭纯孝教授建议总结、整理、出版唐敖庆院士教学成果。经吉林大学党委研究成立了“总结唐敖庆教授教学思想并出版讲课文稿”研究组。由吉林大学理论化学计算国家重点实验室承担这项工作，并先后得到教育部高教司和国家自然科学基金委员会的支持。

1963年原高教部委托唐敖庆院士在吉林大学举办“物质结构讨论班”，为期三年。唐敖庆院士在讨论班上，根据国内理论化学科研和教学的需要，系统地讲述了有关群论的理论方法和应用。经过研究组讨论，认为总结、整理唐敖庆院士在这方面的教学成果有重要的意义。由李伯符教授承担这项工作，郭纯孝教授辅助做这项工作。

福州物质结构研究所刘春万教授和吉林大学裘祖文教授提供了当年唐敖庆院士讲课时所记的笔记。经过研究，认为重点选择唐敖庆院士讲课若干主要内容加以整理可能是适当的（例如，有关置换群和连续群的特征标方面涉及的很少），为了适当地反映唐敖庆院士所领导的科研集体在群论应用方面的某些研究成果，在分子的不可约张量方法方面有所补充。本书的初稿先后送给鄢国森教授、刘春万教授、李前树教授、吴兆颜教授、朱诚久教授和于微舟教授进行审阅，在听取了这些专家的意见后又经过三次修改，最后定稿为“理论化学中的群论方法”。唐敖庆院士由于健康原因没有对本书稿进行过审阅。因此，书中难免有疏漏、缺点，甚至错误，恳请读者提出宝贵意见。

向审阅本书初稿的各位专家表示衷心的感谢，也向教育部高教司、国家自然科学基金委员会的支持表示衷心的感谢。

孙家钟
2003年9月

目 录

第一章 有限群理论基础.....	1
1.1 群	1
1.2 共轭类	6
1.3 群的直积与直积群	9
1.4 群的同态与同构.....	10
1.4.1 同态.....	10
1.4.2 同构.....	12
1.5 线性空间和线性变换群, 线性变换群的矩阵表示	12
1.6 内积空间与酉变换.....	17
1.7 群的表示.....	20
1.7.1 群表示的定义.....	20
1.7.2 三维空间中的旋转群的矩阵表示.....	21
1.7.3 变换作用于函数空间以及变换的矩阵表示.....	24
1.8 可约表示与不可约表示.....	25
1.9 有限群表示理论中的基本定理.....	28
1.10 群的特征标	35
1.10.1 特征标及其基本性质	35
1.10.2 有限群特征标的基本定理	36
1.11 群空间与群代数	38
1.11.1 群空间与群代数的定义	38
1.11.2 群函数与函数空间	41
1.11.3 类空间与类函数空间	43
1.12 直积表示和直积群的表示	47
1.12.1 直积表示	47
1.12.2 直积群的表示	48
1.13 有限群不可约表示的分类	49
第二章 点群	52
2.1 三维正交群.....	52
2.2 点群概要.....	55
2.2.1 点群的分类.....	55
2.2.2 点群元素的类型.....	55
2.2.3 点群共轭类的划分.....	57

2.3 第一类点群	59
2.3.1 单轴点群	59
2.3.2 二面体群	59
2.3.3 正四面体群	62
2.3.4 正八面体群	65
2.3.5 正二十面体群	67
2.4 第二类点群	68
2.4.1 由第一类点群 G 和空间反演群 $I = \{e, i\}$ 的直积构成的第二类点群	68
2.4.2 不包括空间反演 i 的第二类点群	70
2.5 点群完备性的证明	73
2.5.1 第二类点群的性质	75
2.5.2 $SO(3)$ 群的所有可能的有限子群	76
2.6 晶体学点群与描述分子对称性的连续群	80
2.6.1 由点群推广而得到的连续群	80
2.6.2 晶体学点群	81
2.7 点群小结	82
第三章 点群的不可约表示与 Clebsch-Gordan 系数	86
3.1 函数空间上的算子群与群表示的基函数	86
3.2 基础表示与诱导表示	89
3.2.1 基础表示	90
3.2.2 诱导表示	92
3.2.3 诱导表示的有关定理	93
3.2.4 诱导表示的举例	95
3.3 C_n 群和 D_n 群的不可约表示	96
3.3.1 Abel 点群 C_n 和 D_2 的不可约表示及其基矢	98
3.3.2 D_n 群 ($n \geq 3$) 的不可约表示	104
3.4 T 群和 O 群的不可约表示	112
3.4.1 正四面体群 (T 群) 的不可约表示	112
3.4.2 正八面体群 (O 群) 的不可约表示	116
3.4.3 利用诱导表示方法由 T 群得到 O 群的表示	121
3.5 第二类点群的不可约表示	124
3.5.1 第二类点群中直积群的不可约表示	124
3.5.2 与第一类点群同构的第二类点群的不可约表示	126
3.6 线性分子对称群的不可约表示	128
3.6.1 直积群 $D_{\infty h}$ 的不可约表示	128
3.6.2 $C_{\infty v}$ 群的不可约表示	130
3.7 双值群 $SO(3)^*$, $O(3)^*$ 与 $SO(3)$ 群的双值表示	130
3.7.1 $SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群同态	130

3.7.2 双值群 $SO(3)^*$	133
3.8 双值点群及其双值表示	135
3.8.1 双值点群的结构以及共轭元素类	135
3.8.2 双值点群 $\mathcal{C}_n^*$ 及其不可约表示	135
3.8.3 双值群 D_n^* 及其不可约表示	137
3.8.4 双值点群 T^* 和 O^* 及其不可约表示	141
3.8.5 第二类双值点群	143
3.9 点群的 Clebsch-Gordan 系数	143
3.9.1 点群不可约表示直积的分解与 Clebsch-Gordan 级数	143
3.9.2 点群的 Clebsch-Gordan 系数	144
3.9.3 点群 Clebsch-Gordan 系数的对称性与 V-系数	147
3.10 点群的再耦合系数与 W-系数	149
3.11 O 群的 V-系数和 W-系数	152
3.11.1 O 群不可约表示直积分解	152
3.11.2 O 群不可约表示的标准化基矢与不可约表示的标准矩阵	152
3.11.3 O 群单值表示的 V-系数	158
3.11.4 O 群单值表示的 W-系数	161
3.12 点群不可约张量算子和 Wigner-Eckart 定理	162
3.12.1 点群不可约张量算子	162
3.12.2 点群不可约张量算子的 Wigner-Eckart 定理	164
3.12.3 耦合不可约张量算子的 Wigner-Eckart 定理	166
第四章 点群表示理论在分子结构中的应用	169
4.1 Schrodinger 方程及其对称群	169
4.2 投影算子与对称性匹配基矢	174
4.2.1 投影算子	174
4.2.2 D_4 群的投影算子与对称性匹配的基矢	177
4.2.3 T 群的投影算子与对称性匹配的基矢	180
4.3 分子结构中的 LCAO-MO 与 SALC-MO 方法	183
4.3.1 分子轨道 LCAO-MO 方法	183
4.3.2 对称匹配分子轨道 SALC-MO 方法	184
4.3.3 休克尔近似方法	184
4.4 不同对称性分子的分子轨道的对称性分析	188
4.4.1 C_{2v} 对称性分子的对称匹配轨道	188
4.4.2 C_{3v} 对称性分子的对称性匹配轨道	189
4.4.3 D_{4h} 对称性分子的对称匹配轨道	191
4.4.4 D_{5d} 对称性分子的对称匹配轨道	194
4.4.5 O_h 对称性的正八面体 AB_6 型分子对称匹配轨道	196
4.4.6 T_d 对称性的正四面体 AB_4 型分子对称匹配轨道	198

4.5 原子轨道和杂化轨道	199
4.5.1 原子轨道的变换性质	199
4.5.2 杂化轨道理论	201
4.5.3 群论的处理方法	201
4.5.4 常见几何构型杂化轨道	202
第五章 空间群	208
5.1 空间群与 Bravais 点阵	208
5.1.1 Euclidean 群	208
5.1.2 空间群与 Bravais 点阵	210
5.1.3 空间群元素的类型	212
5.2 空间群的七个系列和 14 种 Bravais 点阵	212
5.2.1 空间群的七个系列(七个晶系)	212
5.2.2 平移群 T_c^* 点阵的 14 种类型	215
5.3 空间群的确定及其符号	223
5.3.1 空间群的确定及其符号	223
5.3.2 三斜系和单斜系空间群的确定	227
5.4 正交系空间群	232
5.4.1 正交系 C_{2v} 类空间群	233
5.4.2 D_2 类空间群	236
5.4.3 D_{2h} 类空间群	237
5.5 三角系空间群	238
5.5.1 C_3 类空间群和 $S_6 = C_{3i}$ 类空间群	239
5.5.2 C_{3v} 类空间群	239
5.5.3 D_3 类和 D_{3d} 类空间群	240
5.6 四角系和六角系空间群	241
5.6.1 四角系空间群	241
5.6.2 六角系空间群	245
5.7 立方系空间群	246
5.7.1 T 类空间群	246
5.7.2 O , T_h , T_d 和 O_h 类空间群	249
5.8 周期性边界条件与平移群的有限化	251
5.9 空间群的推广——Shubnikov 群	251
5.9.1 Shubnikov 点群	253
5.9.2 Shubnikov 空间群	256
5.10 Shubnikov 空间群举例	261
5.10.1 三斜系 Shubnikov 空间群	261
5.10.2 单斜系 Shubnikov 空间群	261
5.11 空间群小结	262

第六章 空间群的表示理论	265
6.1 平移群的不可约表示与波矢空间	265
6.1.1 平移群的不可约表示与波矢向量	265
6.1.2 倒易空间的倒易点阵与 Brillouin 区	267
6.2 共轭表示与空间群的子群——小群	270
6.2.1 共轭表示	270
6.2.2 空间群的子群——小群	272
6.2.3 空间群 G^P 按小群左陪集的分解与波矢星	274
6.3 小表示与允许小表示	278
6.4 空间群的不可约表示	280
6.4.1 由允许小表示诱导出的空间群的诱导表示	280
6.4.2 关于诱导表示的两个基本定理	283
6.4.3 简单空间群和 Brillouin 区内部的波矢 k 的小群 G_k^P 的允许小表示	285
6.4.4 第一 Brillouin 区边界上的 k 所对应的小群 G_k^P 的允许小表示	286
6.4.5 构造空间群不可约表示的基本方法	292
6.5 空间群不可约表示举例	293
6.5.1 空间群 O^3 三种波矢的不可约表示	293
6.5.2 空间群 O_h^5 的不可约表示	301
6.5.3 空间群 O^2 与 O_h^3 的不可约表示	302
6.6 空间群表示理论对晶体能带理论的应用	304
6.7 Shubnikov 群表示理论概要——共表示简介	306
6.8 空间群表示理论小结	307
第七章 置换群及其表示理论	309
7.1 置换群	309
7.1.1 置换群	309
7.1.2 循环与对换及置换的分解	311
7.2 置换群的共轭元素类, 分割与 Young 图	314
7.2.1 置换群的共轭类	314
7.2.2 分割与 Young 图	316
7.3 置换群的子群与 Caylay 定理	318
7.4 Frobenius 公式与置换群的特征标	321
7.4.1 由子群特征标推导群的特征标	321
7.4.2 一些简单置换群的特征标	323
7.4.3 Frobenius 公式与置换群的特征标	327
7.5 置换群不可约表示特征标与标准 Young 盘	332
7.5.1 标准 Young 盘与置换群不可约表示的维数	332
7.5.2 置换群 S_n 的不可约表示特征标	338
7.5.3 共轭表示及其特征标之间的关系	339

7.6 置换群的标准不可约表示	340
7.6.1 置换群 S_n 的不可约表示对子群 S_{n-1} 的分解规则	340
7.6.2 置换群不可约表示的标准基矢——Yamanouchi 符号	341
7.7 标准不可约表示的表示矩阵	345
7.7.1 由 S_{n-1} 群表示矩阵寻求 S_n 群表示矩阵的 Young-Yamanouchi 定理	346
7.7.2 S_2, S_3, S_4 群的标准不可约表示矩阵	348
7.8 Young 算子与置换群不可约表示的基矢	352
7.8.1 Young 算子	352
7.8.2 标准 Young 算子与标准表示	356
7.9 置换群表示理论对 Fermi 子体系的应用	357
7.9.1 由总自旋函数和总轨道函数构成的全反对称函数	358
7.9.2 置换群的外积与自旋函数	361
第八章 全同核置换反演群与分子对称群及其在分子光谱中的应用	364
8.1 分子 Hamiltonian 群与全同核置换反演群	364
8.1.1 分子 Hamiltonian 及其对称群	364
8.1.2 全同核置换反演群 CNPI	369
8.2 CNPI 群与分子对称群	372
8.2.1 CNPI 群与分子点群	372
8.2.2 等价平衡构型与 MS 群	373
8.2.3 CNPI 和 MS 群的关系	376
8.3 CNPI 群和 MS 群对非刚性分子光谱的应用	381
8.3.1 CH_3BF_2 分子及其光谱	381
8.3.2 CH_3-CH_3 分子及其光谱	387
8.3.3 N_2H_4 分子及其光谱	389
8.4 准刚性分子振动光谱的群论分析	392
8.4.1 准刚性分子的振动光谱的简正振动分析	392
8.4.2 群论方法解析简正振动的理论基础	392
8.4.3 分子简正振动分析举例	394
8.4.4 配合物振动光谱的简正振动解析	396
8.4.5 红外简正振动在确定配合物构型中的应用	396
8.4.6 碳原子簇的简正振动模式解析	397
第九章 Lie 群与 Lie 代数基础	399
9.1 Lie 群与 Lie 代数	399
9.1.1 Lie 群的定义	399
9.1.2 Lie 群的连通性和紧致性	400
9.1.3 典型 Lie 群及其连通性与紧致性	401
9.2 Lie 群局部性质的 Lie 理论, Lie 群与 Lie 代数	405
9.2.1 Lie 群的无穷小生成元与无穷小变换和无穷小算子	405

9.2.2 局部 Lie 群的 Lie 理论	412
9.2.3 Lie 代数	416
9.3 Lie 代数的基本概念	418
9.4 复半单 Lie 代数的 Cartan 形式	424
9.4.1 Cartan-Weyl 基, Cartan 子代数与半单 Lie 代数的 Cartan 形式	424
9.4.2 Cartan-Killing 度规张量与半单 Lie 代数的判别定理	426
9.5 半单 Lie 代数根的性质与根系	430
9.5.1 半单 Lie 代数根的性质	430
9.5.2 半单 Lie 代数的根系 Σ 与 σ 系	433
9.6 单 Lie 代数与根图	435
9.6.1 秩 $r \leq 2$ 的单 Lie 代数	436
9.6.2 秩 $r > 2$ 的单 Lie 代数	440
9.7 素根, Dynkin 图, 单 Lie 代数的分类	443
9.7.1 素根与 Cartan-Weyl 标准基	443
9.7.2 Dynkin 图与单 Lie 代数的素根系	449
9.7.3 单 Lie 代数素根系 Π 的 Dynkin 图分析	450
9.8 复数域 $\mathbf{C}$ 上的一般线性 Lie 代数 $gl(n, \mathbf{C})$ 及其子代数	458
9.8.1 特殊线性 Lie 代数 $sl(n+1, \mathbf{C})$	459
9.8.2 正交 Lie 代数 $o(m, \mathbf{C})$ 和特殊正交 Lie 代数 $so(m, \mathbf{C})$	461
9.8.3 辛 Lie 代数 $Sp(2n, \mathbf{C})$	462
9.8.4 $gl(n, \mathbf{C})$ 的子代数 $u(n)$ 和 $su(n)$	464
9.8.5 Lie 代数 $gl(n, \mathbf{C})$ 及其子代数小结	465
9.9 典型 Lie 代数的紧致实形	467
9.9.1 实 Lie 代数的复扩充与复 Lie 代数的实形	467
9.9.2 紧致实 Lie 代数	469
9.9.3 典型 Lie 代数的紧致实形	469
9.9.4 典型 Lie 代数与紧致典型 Lie 群	470
9.10 典型 Lie 代数的 Fermi 子实现	472
9.10.1 Fermi 子的产生和消灭算子及其反交换关系	472
9.10.2 Fermi 子体系的最大 Lie 代数 $u(2^\lambda)$	472
9.10.3 $u(2^\lambda)$ 的子代数 $o(4\lambda+1)$ 和 $o(4\lambda)$	474
9.10.4 $SO(4\lambda)$ 群的子群 $SU^Q(2) \otimes Sp(2\lambda)$ 及其群链	475
9.10.5 $SO(4\lambda)$ 群的子群 $U(2\lambda)$ 及其群链	480
第十章 Lie 群与 Lie 代数的表示理论	481
10.1 Lie 群与 Lie 代数的表示	481
10.1.1 表示的一般概念	481
10.1.2 群上不变积分与紧致 Lie 群不可约表示的广义正交定理	482
10.2 半单 Lie 代数的表示与权	484

10.2.1	半单 Lie 代数的表示与权	484
10.2.2	权与根的关系	486
10.2.3	半单 Lie 代数不可约表示的标记	488
10.3	典型 Lie 代数不可约表示的标记及其维数	490
10.3.1	单 Lie 代数的 Chevalley 基	490
10.3.2	典型 Lie 代数不可约表示的标记	490
10.3.3	典型 Lie 代数不可约表示的维数	494
10.3.4	由最高权计算权系的方法	497
10.3.5	Lie 代数 A_n 的反对称表示与对称表示	502
10.4	典型 Lie 代数的直积表示	503
10.4.1	直积表示	503
10.4.2	直积表示的权系与直积表示的分解	504
10.5	Casimir 算子及其本征值	506
10.5.1	Casimir 算子	506
10.5.2	二阶 Casimir 算子的本征值	508
10.5.3	二阶 Casimir 算子本征值的计算	509
10.5.4	Lie 代数 $A_2(su(3))$ 的 Casimir 算子及其本征值	513
第十一章	Lie 代数 $su(2)$, $so(3)$ 和 Lie 群 $SU(2)$, $SO(3)$ 的不可约表示	515
11.1	Lie 代数 A_1 的实形	515
11.1.1	Lie 代数 A_1 的实形	515
11.1.2	非紧致 Lie 代数 $su(1, 1)$ 和 $so(2, 1)$	517
11.2	Lie 群 $SU(2)$ 和 $SO(3)$	519
11.2.1	Lie 群 $SU(2)$ 及其定义域与连通性	519
11.2.2	$SO(3)$ 群及其定义域与连通性	520
11.2.3	$SU(2)$ 群与 $SO(3)$ 群的关系	521
11.3	Lie 代数 $su(2)$ 和 Lie 群 $SU(2)$ 的不可约表示	522
11.3.1	Lie 代数 $su(2)$ 的不可约表示	522
11.3.2	$SU(2)$ 群的有限维不可约表示	528
11.3.3	$SO(3)$ 群的有限维表示	531
11.3.4	$SU(2)$ 和 $SO(3)$ 群的表示矩阵 $D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ 的性质与特征标	536
11.3.5	$SU(2)$ 和 $SO(3)$ 群的上积分和不可约表示的广义正交定理	539
11.3.6	$SU(2)$ 群有限维不可约表示的完备性	541
11.3.7	$O(3)$ 群的不可约表示	541
11.4	$SU(2)$ 群的 Clebsch-Gordan 系数、耦合基矢和 Racah 系数	542
11.4.1	$SU(2)$ 群直积表示的不可约表示分解与 Clebsch-Gordan 系数	543
11.4.2	角动量的耦合与耦合基矢	547
11.4.3	Clebsch-Gordan 系数的对称性与 3-j 符号	550
11.4.4	Racah 系数与 6-j 符号、9-j 符号	552

11.5 $SO(3)$ 群的不可约张量算子和 Wigner-Eckart 定理	558
11.5.1 $SO(3)$ 群的不可约张量算子	558
11.5.2 Wigner-Eckart 定理	563
11.5.3 不可约张量算子矩阵元的选择定则	568
11.6 $SO(3)$ 群与其分立子群(点群)的关系	569
11.6.1 $SO(3)$ 群不可约表示(I)向子群 G 的不可约表示(Γ)的分解	569
11.6.2 $SO(3)$ 点群的群间耦合系数	571
第十二章 典型紧致 Lie 代数的不可约表示	573
12.1 $U(n)$ 群和 $SU(n)$ 群的不可约表示与不可约张量方法	573
12.1.1 $U(n)$ 群变换下的张量和张量空间	573
12.1.2 张量空间的约化与不可约张量	575
12.1.3 $U(n)$ 群不可约表示的完备性、Young 图与不可约表示的维数	581
12.1.4 $SU(n)$ 群的不可约表示	583
12.1.5 $U(n)$ 群和 $SO(n)$ 群的特征标与不可约表示直积的分解	584
12.1.6 $U(n)$ 群不可约表示的标准化不可约张量基	587
12.2 $U(n)$ 和 $SU(n)$ 群的不可约表示 Lie 代数方法	592
12.2.1 $U(n)$ 群和 $SU(n)$ 群的不可约表示	592
12.2.2 $U(n)$ 群的特征标	598
12.2.3 $U(n)$ 群不可约表示的正则基——Gelfand 基	601
12.3 $O(n)$ 群的不可约表示与不可约张量方法	603
12.3.1 $O(n)$ 群的不可约张量表示	604
12.3.2 $U(n)$ 群不可约表示对 $SO(n)$ 群的分解	609
12.4 $SO(n)$ 群的不可约表示 Lie 代数法	612
12.4.1 $SO(n)$ 群不可约表示的最高权	612
12.4.2 $SO(n)$ 群不可约表张量表示的最高权	614
12.4.3 $SO(n)$ 群的特征标	616
12.5 $Sp(2m)$ 群的不可约表示	618
12.5.1 $Sp(2m)$ 群的不可约表示与不可约张量方法	618
12.5.2 $Sp(2m)$ 群的不可约表示与 Lie 代数法	624
第十三章 Lorentz 群	626
13.1 Lorentz 群及其 Lie 代数 $so(3, 1)$	626
13.1.1 Lorentz 群的定义	626
13.1.2 Lorentz 群的 Lie 代数	627
13.1.3 Lorentz 群的紧致性和连通性	629
13.2 Lorentz 群参数化	630
13.3 Poincare 群与 Lorentz 变换	632
13.3.1 Poincare 群	632
13.3.2 Lorentz 变换及其物理意义	634

13.4 $SL(2)$ 群与 $L_+^\dagger$ 群同态	637
13.4.1 Lie 代数 $sl(2)$ 与 $so(3, 1)$ 同构	637
13.4.2 $SL(2)$ 群与 $L_+^\dagger$ 群的同态关系	638
结束语——物质世界的对称性	642
一、四维时间-空间的对称性及相关物理规律	642
(一) 四维时空中时间的对称性	642
(二) 空间对称性	643
(三) 相对论的时空对称性	643
二、全同粒子置换对称性及其物理规律	643
三、动力学对称性与动力学群	644
四、基本粒子的内禀空间与内禀空间的对称群	647
(一) 电子自旋与自旋空间的 $SU(2)$ 群	647
(二) 同位旋与同位旋空间的 $SU(2)$ 群	648
(三) 规范群	648

第一章 有限群理论基础

在这一章中首先讨论有限群理论中的基本概念,以及相关的定理;而后重点讨论有限群表示问题,以及特征标,给出并证明一些重要定理,为以后各章中群的专题研究提供必要的准备.这一章的内容是学习群论的必要的基础,是进入群论这一数学领域的必由之路.深刻地理解群,特别是群的表示理论,需要一定的线性代数基础知识,读者必要时可补习一下线性代数的基础知识.

1.1 群

在本节中将讨论群的定义,以及相关的定理.群(group)是数学中的一个重要概念,它描述内部存在特定联系的元素集合,集合内的元素在数学上是抽象的,但在物理或化学以及其它学科的应用中,这些元素将具有特定的物理意义和几何意义.

定义 1.1.1 令 $G = \{g_1, g_2, \dots, g_N\}$ 是一元素集合, $g_1, g_2, \dots, g_N$ 是集合 G 中的元素,在这些元素之间定义一种运算,通常称为乘法.如果集合 G 中的元素在这种运算下,满足如下 4 个条件,则称集合 G 为一个群.这 4 个条件是:

(1) 如果取集合 G 中任意两个元素 g_i, g_k , 它们的乘积 $g_i \cdot g_k = g_l$, g_l 一定也是集合 G 中的一个元素,即:若 $g_i, g_k \in G$, 则 $g_i \cdot g_k = g_l \in G$. 这一性质称为封闭性

(2) 对于集合 G 中的任意元素 g_i, g_k, g_l , 存在关系:

$$(g_i \cdot g_k) \cdot g_l = g_i \cdot (g_k \cdot g_l)$$

即集合内元素在所定义的运算下,遵循结合律.(这也是群内元素间的运算称为乘法的原因,因为所有的乘法都遵循结合律).

(3) 集合 G 中存在一个而且只存在一个元素 g_0 , 使得对集合内任意元素 g_i 存在关系

$$g_0 \cdot g_i = g_i \cdot g_0 = g_i$$

称这个唯一的元素 g_0 为单位元,一般记为 e .

(4) 集合中每个元素 g_i 都存在一个元素 g_i^{-1} , 使得

$$g_i \cdot g_i^{-1} = g_i^{-1} \cdot g_i = e$$

称 g_i 与 g_i^{-1} 互为逆元素.

下面举几个简例来说明群的定义.

例 1 全部实数在加法下构成一个群.

实数相加仍然为实数,因而它满足封闭性;加法运算满足结合律, 0 为单位元, 实数 $(-x)$ 与 x 互为逆元素.

例 2 除去 0 之外的全部实数在乘法下构成一个群.

这个群也是显然的,实数相乘还是实数,满足封闭性;实数乘法符合结合律; 1 为单

位元; 实数 x 与实数 $1/x$ 互为逆元素. 但是实数 0 与任意实数相乘都不可能为 1, 因而 0 没有逆元素存在, 所以包括 0 在内的全部实数在乘法下不构成群.

例 3 二维旋转群 R_2 .

在三维空间中取任一矢量 R , 绕 R 的所有转动构成一个群, 称为二维旋转群, 通常记为 R_2 . 绕 R 转动 θ 角, 为群 R_2 中的一个元素, 记为 $R(\theta)$, 两个旋转 $R(\theta_1)$ 和 $R(\theta_2)$ 之间的乘法定义为转动 $R(\theta_1 + \theta_2)$, 即

$$R(\theta_1) \cdot R(\theta_2) = R(\theta_1 + \theta_2)$$

显然这种转动是封闭的, 而且遵守结合律, $R(0) = R(2n\pi)$ 为单位元, $R(\theta)$ 与 $R(-\theta)$ 互为逆元素.

定义 1.1.2 设 H 是群 G 的一个子集, 若对于群 G 定义的乘法运算, H 也构成一个群, 则称 H 为 G 的子群 (subgroup), 记为 $H \subset G$.

群 G 的子集 H 构成子群的条件是: 若 $g_i, g_j \in H$, 则 $g_i \cdot g_j \in H$, 若 $g_i \in H$, 则 $g_i^{-1} \in H$, H 包括单位元 e .

对于任何群 G , 单位元 e 本身为 G 的子群, G 也可认为是 G 本身的子群. 但是这两个子群并没有实质上的意义, 一般称为平庸子群或显然子群. 群 G 除了上述平庸子群外的真正子群称为真子群或固有子群.

例 4 前面例 1 所给出的实数群中, 取全部整数, 它们在加法运算下, 仍然为一个群, 因而全部整数所构成的加法群为全部实数所构成的加法群的子群.

例 5 C_3 群, 保持平面上正三角形不变只有一个轴的转动构成的对称群称为 C_3 群. 它包括绕垂直正三角形平面并通过正三角形中心的轴转 $2\pi/3$, $4\pi/3$ 和 $6\pi/3 = 2\pi$ 的三个转动, 转动 2π 的转动为单位元素. 显然它是 R_2 群的子群.

从前面的例子可看到一个群可包括子群, 群的元素可以是连续的无穷多个, 如实数群; 也可以是分立的无穷多个, 如整数群; 也可以是有限个, 如 C_3 群. 由有限个元素构成的群称为有限群. 有限群所包括的元素数目称为群的阶数.

对于有限群, 一般要构造出它们的乘法表, 用这种表来描述它们乘法运算的关系. 如 C_3 群只有 3 个元素, 即 $e, R(2\pi/3), R(4\pi/3)$, 下面列出了它的乘法表:

C_3 的乘法表			
R_3	e	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$
e	e	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$
$R(2\pi/3)$	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	e
$R(4\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	e	$R(2\pi/3)$

为了构造和描述群的乘法, 有一个重要定理, 即重排定理.

定理 1.1.1 (重排定理) 令 $G(g_1, g_2, \dots, g_N)$ 为一个群. 取其中的一个特定元素 $g_k \in G$, 它与 G 中任一元素 g_α 之乘积, $g_k \cdot g_\alpha = g_l$ 仍然为 G 中的一个元素, 当 α 取遍整个群时, l 也取遍整个群, 而且对给定的 g_α , g_l 只出现一次.

证明 首先证明 G 中的任何元素 g_α 都可写为群中一个元素 g_β 与另一个元素 g_γ 之积, 即 $g_\alpha = g_\beta \cdot g_\gamma$. 为了证明 g_γ 为群 G 中的元素, 只须用 g_β 之逆 g_β^{-1} 乘上前式得到

$$g_{\beta}^{-1} \cdot g_{\alpha} = g_{\beta}^{-1} \cdot g_{\beta} \cdot g_{\gamma} = g_{\gamma}$$

进一步再证明对给定元素 g_{α} 和 g_{β} , g_{γ} 是唯一的, 比如还存在元素 $g_{\gamma'}$ 与 g_{β} 之积也是 g_{α} , 即 $g_{\beta} \cdot g_{\gamma} = g_{\beta} \cdot g_{\gamma'}$. 此时用 g_{β}^{-1} 乘上式得到 $g_{\beta}^{-1} \cdot g_{\beta} \cdot g_{\gamma} = g_{\beta}^{-1} \cdot g_{\beta} \cdot g_{\gamma'}$, 于是 $g_{\gamma} = g_{\gamma'}$, 而对一定的元素 g_{β} , 当 g_{γ} 取不同元素时, 就得到了不同的 g_{α} . 最后就可得到当 g_{γ} 取遍整个群时, 就对一定的 g_{β} 得到了群的全部元素 g_{α} , 而且每个 g_{α} 只出现一次. 这就证明了这一定理.

重排定理告诉我们, 对有限群可构造一个乘法表, 即把 N 个群元素按一定次序排成一行, 按相同次序再排成一列, 把第 i 行与第 j 列的元素 g_i 和 g_j 之积 $g_i \cdot g_j$ 列入第 i 行与第 j 列交叉之处, 于是全部乘法结果就构成了一个 N 行 N 列的乘法表. 在这个表中每一行或每一列都是 N 个群元素的不同排列.

例 6 D_3 群的乘法表.

D_3 群是由保持平面上正三角形不变的转动群, 它有六个元素, 分别为 (如下图所示)

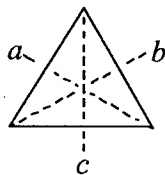
e (单位元): 不变;

d : 绕垂直正三角形平面并通过三角形重心的轴转 $2\pi/3$ 角度;

f : 绕上述轴转 $4\pi/3$;

a, b, c 分别为绕正三角形三个分角线转 π 角的转动.

下面列出了这六个变换操作的乘法表.



D_3 的乘法表

D_3	e	d	f	a	b	c
e	e	d	f	a	b	c
d	d	f	e	c	a	b
f	f	e	d	b	c	a
a	a	b	c	e	d	f
b	b	c	a	f	e	d
c	c	a	b	d	f	e

利用子群可定义群的左陪集和右陪集, 陪集 (cost) 在群论中有着重要的作用.

定义 1.1.3 令 H 是群 G 的子群 $H = \{h_1, h_2, \dots, h_k\}$, 取 G 中一个不属于子群 H 的元素 g , 即 $g \in G, g \notin H$. 按群的乘法, 可由 g 和子群构造出一个元素集合, 即

$$gH = \{g \cdot h_1, g \cdot h_2, \dots, g \cdot h_k\}$$

由于 g 是从左边乘 H , 称这个集合为子群 H 的左陪集, 同样也可构造出元素集合.

$$Hg = \{h_1 \cdot g, h_2 \cdot g, \dots, h_k \cdot g\}$$

称 Hg 为子群 H 的右陪集. 由于 $g \in G, h_1, \dots, h_k \in G$, 因而陪集中均为群 G 的元素, 而 $g \notin H, h_1, \dots, h_k \in H$, 因而陪集中的元素均不在子群 H 之中, 否则将破坏子群的封闭性. 陪集中元素的数目等于子群 H 内元素的数目, 也就是说陪集中元素的数目等于子群的阶数.

定理 1.1.2 (陪集定理) 令 H 为 G 的子群, 则子群 H 的两个左陪集或者具有完全相同的元素, 或者没有任何相同的元素, 对右陪集亦然.